УДК 66.048.3

Н. Н. Зиятдинов, Ф. У. Закирова, Д. А. Рыжов, А. А. Караванов

ОПТИМАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ СИСТЕМЫ РЕКТИФИКАЦИОННЫХ КОЛОНН КАК МНОГОУРОВНЕВАЯ ЗАДАЧА

Ключевые слова: гиперструктура, оптимальный синтез, система ректификационных колонн дискретно-непрерывное нелинейное программирование, метод ветвей и границ.

Дается постановка задачи оптимального синтеза системы ректификационных колонн как многоуровневой задачи. Приводится подход к решению задачи с использованием авторского метода основанного на методе ветвей и границ.

Keywords: superstructure, optimal synthesis, system of distillation columns, discrete-continuous nonlinear programming, branch and bounds method.

We give a formulation of the problem of optimal synthesis of distillation columns as a multi-level problem. It is presents an approach to solving the problem using the author's method is based on the method of branch and bound.

Введение

Нефтегазоперерабатывающая и нефтехимическая промышленность, значительное место в которой занимают процессы ректификации, является одной из значимых бюджетообразующих отраслей экономики Республики Татарстан. Дальнейшее развитие этой отрасли требует проектирования и строительства новых высокоэффективных нефтегазоперерабатывающих производств.

Оптимальному синтезу технологических систем разделения уделяется особое внимание, поскольку ректификационные колонны (РК) для разделения многокомпонентных смесей являются высоко металло- и энергоемкими установками [1]. Поэтому, как правило, при оптимальном синтезе систем ректификационных колонн (СРК) в качестве критерия оптимальности используют экономические критерии, которые включают капитальные и эксплуатационные затраты. Капитальные затраты пропорциональны металлоемкости установки и зависят от числа ступеней разделения и флегмовых чисел (потока флегмы) в ректификационных колоннах. Эксплуатационные затраты складываются из затрат на организацию паровых потоков в колоннах, подогрев и охлаждение целевых и промежуточных потоков и возрастают с увеличением потока флегмы.

Теоретический анализ

Задача синтеза СРК ставится следующим образом. Заданы параметры многокомпонентного сырья поступающего на разделение (расход, состав, температура, давление), требования на качество целевых продуктов, проектные ограничения. Требуется спроектировать СРК: определить состав РК и структуру (топологию) схемы, число тарелок в каждой РК, место ввода питания в каждой РК, режимы работы колонн (в частности, расход флегмы, температура в кипятильнике колонны), при которых критерий затрат (сумма эксплуатационных и приведенных капитальных затрат) принимает минимальное значение и выполняются ограничения на качество выпускаемой продукции.

Основная проблема оптимального синтеза СРК заключается в том, что количество возможных вариантов разделения исходной смеси увеличивается экспоненциально с ростом числа получаемых продуктов. Так для разделения многокомпонентной смеси на s чистых компонентов или фракций необходимо спроектировать систему, состоящую из $(s-1)$ простых колонн непрерывного действия. Число возможных вариантов разделения исходной смеси рассчитывается по формуле, полученной в начале 1950-х гг. независимо С.В. Львовым и Харбертом [1]:

$$z = \frac{(2(s-1))!}{s!(s-1)!} \qquad (1)$$

Из нее следует, что с увеличением числа фракций число вариантов резко возрастает. Так, при $s = 7$ число вариантов равно 132, а при $s = 10$ уже 4862. Данная задача носит типично комбинаторный характер и при большом числе продуктов фракционирования поиск оптимальной технологической схемы перебором различных вариантов схем становится весьма трудоемкой процедурой по вычислительным и временным затратам. Поэтому разработка эффективных по быстродействию и надежности подходов и алгоритмов для синтеза оптимальных СРК является актуальной задачей.

Решение задачи оптимального синтеза СРК представляет собой многоуровневую процедуру, которую в общем случае можно представить в виде блок-схемы показанной на рисунке 1.

При применении гиперструктур [2-4] или эвристических правил [4-7] в решении задачи синтеза СРК для оценки оптимальности синтезируемых схем используются методы нелинейного программирования, в частности, последовательной безусловной минимизации. На каждом шаге оптимизации для оценки критерия эффективности проводится расчет материального и теплового балансов СРК, который сводится к решению системы, в общем случае, нелинейных уравнений [5]. При расчете материального и теплового балансов СРК выполняется

многократный расчет математической модели ректификационной колонны.

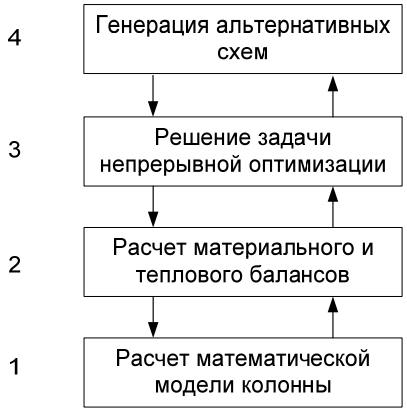

Рис. 1 − Блок-схема решения задачи синтеза СРК

На каждом уровне могут применяться свои эффективные методы, в частности, рассмотренные далее. Однако простое их объединение, пусть даже самых совершенных, приводит к неэффективной работе многоуровневого метода в целом [5]. Об эффективности работы многоуровневого алгоритма синтеза СРК можно судить по количеству обращений к расчету модели ректификационной колонны.

Рассмотрим подробнее методы решения каждой вышеописанной подзадачи.

На 1-м уровне производится расчет математической модели ректификационной колонны. В настоящее время выделяют упрощенные и строгие методы расчета модели ректификационной колонны [8].

Упрощенные метод, нашедшие широкое применение в инженерной практике, основаны на расчете минимального флегмового числа. К данной группе относятся методы Джиллилянда, С. Львова, Б. Михайловского и др. Однако такие модели используются в основном при четком делении многокомпонентных смесей, что затрудняет их использование для решения задачи синтеза СРК на основе гиперструктур.

Строгие методы предполагают использование потарелочных математических моделей многокомпонентной ректификации [1]. К этой группе относятся методы последовательного расчета состава фаз от тарелки к тарелке. При этом принимается, что уравнения материальных балансов и уравнения рабочих линий, выведенных для бинарных систем, могут быть применены при рассмотрении движения каждого из компонентов сложной смеси. В потарелочных методах расчет выполняется последовательно, начиная с куба или дефлегматора от тарелки к тарелке с последующей проверкой выполнения уравнений материального баланса, либо с обоих концов колонны до тарелки питания с проверкой условий сопряжения в месте ввода питания. После очередного расчета уточняется начальное приближение, и вычисление повторяется до выполнения критерия окончания расчетов. Из потарелочных методов, наибольшее распространение на практике получили методы Тиле-Геддеса и Льюиса-Маттесона [1]. В основе потарелочных методов лежит модель тарелки.

Опишем математическую модель k-ой тарелки ректификационной колонны (рис. 2).[9]

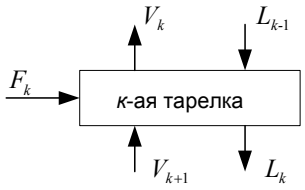

Рис. 2− Информационная блок схема k -ой тарелки ректификационной колонны.

Уравнение покомпонентного материального баланса:

$$F_k z_{ik} + L_{k-1} x_{i,k-1} + V_{k+1} y_{i,k-1} - L_k x_{ik} - V_k y_{ik} = 0, \quad (2)$$
$$i = 1,...,NC, \quad k = 1,...,NT.$$

Уравнения фазового равновесия:

$$y^*_{ik} = K_{ik} x_{ik}, \quad (3)$$
$$K_{ik} = K(T_k, P_k, x_{ik}). \quad (4)$$

Уравнение, связывающее равновесную и рабочую концентрации i-го компонента через η_{ik} – локальный эффективный коэффициент полезного действия тарелки, имеет вид:

$$y_{ik} = y_{i,k+1} + \eta_{ik}(y^*_{ik} - y_{i,k+1}) \quad (5)$$

Стехиометрические соотношения для составов жидкой и паровой фаз:

$$\sum_i x_{ik} = 1, \ \sum_i y_{ik} = 1, \ k = 1,...,NT. \quad (6)$$

Уравнения теплового баланса:

$$FH_{Fk} + L_{k-1}H_{l,k-1} + V_{k+1}H_{v,k+1} - L_k H_{lk} - V_k H_{vk} = 0$$
$$k = 1,...,NT, \quad (7)$$
$$H_{lk} = H(T_k, P_k, x_k), \ H_{vk} = H(T_k, P_k, y_k),$$
$$H_{Fk} = H(T_f, P_f, z_{ik}).$$

где i – номер компонента смеси ($i = 1,..,NC$), NC – число компонентов в смеси, k - номер тарелки;. Массовые доли i-го компонента на k-ой тарелке в жидкой и газовой фазе обозначим через x_{ik} и y_{ik} соответственно. Тарелки в колонне связаны между собой потоками пара V_k и жидкости L_k. Так же имеется возможность подавать на тарелку поток питания F_k. Энтальпия каждого потока (H_v – парового, H_l – жидкостного) рассчитывается на основе температуры на тарелках T_k. Давление P_k определяется на каждой тарелке колонны.

В уравнении (5) η_{ik} является оценкой разделительной способности контактного устройства и характеризует движущую силу процесса, определяемую кинетикой массопередачи и гидродинамической структурой взаимодействующих потоков пара и жидкости [10].

Отметим, что уравнения термодинамических свойств (констант фазового равновесия K_{ik} и энтальпии жидкости H_{lk}, пара H_{vk}, питания H_{fk}) представлены в неявном виде, и требуют для расче-

та знания моделей физических свойств смесей на тарелках [11].

В настоящее время, в России и за рубежом все большую популярность приобретают методы «двухуровневого расчета» уравнений математической модели ректификационной колонны. Смысл данных методик заключается в упрощенном расчете уравнений балансов и фазового равновесия во внутреннем цикле и уточнения значений температур и расходов во внешнем цикле с использованием строгих методов расчета. К данной группе методов относятся «sumrates», «bubble point», «inside-out» [9].

На 2-м уровне производится расчет материального и теплового балансов СРК. Такая задача часто называется расчетом стационарного режима СРК и, как правило, заключается в определении параметров промежуточных и выходных потоков при заданных режимных и конструктивных параметрах установки. При наличии рецикловых материальных и тепловых потоков эта задача сводится к решению системы нелинейных уравнений. Методы решения систем нелинейных уравнений и исследование их эффективности для расчета стационарных режимов химико-технологических систем (ХТС) подробно рассмотрены в книге [5]. Отметим, что эффективными методами решения системы нелинейных уравнений являются квазиньютоновские методы [5, 12].

На 3-м уровне решается задача оптимизации по непрерывным поисковым переменным (режимным и конструктивным параметрам установки) СРК с заданной топологией.

Задача оптимизации технологических систем чрезвычайно сложна, имеет большую размерность, требует огромного числа операций даже для одного расчета значения критерия, поэтому выбор метода оптимизации является важным этапом при синтезе СРК.

Большинство задач оптимизации химико-технологических процессов по непрерывным поисковым переменным (режимным параметрам установки) может быть представлено в следующем виде [5]:

$$\min_{u \in S} f(u), \qquad (8)$$

где f – вещественная функция переменной $u \in E^n$, $S \subseteq E^n (S \neq \varnothing)$.

Семейство задач на безусловный минимум соответствует случаю $S \equiv E^n$ в задаче (8). Семейство задач минимизации с ограничениями, представляющее так называемую общую задачу нелинейного программирования, получается из выражения (8), если $S \subset E^n$ определяется системой равенств и неравенств

$$S = \left\{ u : u \in E^n,\ \phi_i(u) = 0, i = 1,...,p,\ \psi_j(u) \le 0, j = 1,...,q \right\} \quad (9)$$

Методы решения задач минимизации можно разделить (в известной степени условно) на две группы. К первой относятся так называемые прямые методы, базирующиеся на непосредственном сравнении значений функции в соседних точках, ко второй – непрямые методы, при использовании которых положение минимума определяется с помощью соответствующего необходимого условия.

Излагаемые ниже методы носят итерационный характер, т. е. представляют собой совокупность определенных вычислительных процедур с применением рекуррентных формул, результатом выполнения которых является построение конечной или бесконечной последовательности точек $\{u_i\} \in E^n$, $i = 0,1,...$, позволяющей с заданной точностью найти минимум $f(u)$. В методах безусловной минимизации, т. е. методах решения задач без ограничений, соответствующая последовательность $\{u_i\} \in E^n$ обладает свойством:

$$f(u_0) > f(u_1) > ... \ge \min f(u), \qquad (10)$$

где f – минимизируемая функция.

Прямые методы (методы «спуска») решения задач непрерывной оптимизации делятся на две группы: методы безусловной минимизации и методы оптимизации при наличии ограничений.

Рассмотрим общую характеристику поисковых методов в отсутствие ограничений типа равенства и неравенства. Большинство методов безусловной минимизации предусматривает построение последовательности $\{pi\}$, $i = 0,1,\ldots$, направлений движения к минимуму $f(u)$.

В случае безусловной оптимизации основное отличие одного метода от другого заключается в способе построения направления. При этом соседние точки последовательности $\{u^i\}$ связаны соотношением:

$$u^{i+1} = u^i + \alpha^i p^i, \qquad (11)$$

где α^i – параметр, определяющий длину шага вдоль направления p^i, выбираемую некоторым определенным способом.

Направление p^i определяется из соотношения

$$p^i = -H_i^T g^i \qquad (12)$$

В общем случае вектор направления p^i является некоторой явной функцией точки u^i, предыдущих точек u^{i-1}, u^{i-2},…, векторов градиентов g^i, g^{i-1},…, минимизируемой функции f и матриц G^i, G^{i-1},…, ее вторых производных (Гессе), вычисленных в точках u^i, u^{i-1},…, т.е.

$$p^i = p^i(u^i, u^{i-1}, ...; g^i, g^{i-1}, ...; G^i, G^{i-1}, ...) \qquad (13)$$

В зависимости от максимального порядка производных, входящих в выражение для вычисления вектора направления, алгоритмы минимизации относятся, соответственно, к методам нулевого, первого и второго порядка. Очевидно, чем больше информации о минимизируемой функции используется при выборе направления минимизации, тем эффективнее поиск [5]. Отсюда следует, что целесообразно использовать методы первого и второго порядков во всех случаях, когда это возможно.

Классический метод наискорейшего спуска (Коши) соответствует выбору $H^i = I_r$, где I_r – единичная матрица размерности $r \times r$.

Классический метод Ньютона соответствует выбору $H^i = \left(G^i\right)^{-1}$. Основной недостаток метода

Ньютона – использование вторых производных минимизируемой функции, получение которых в реальных задачах чрезвычайно трудоемко.

Этого недостатка лишены методы переменной метрики или квазиньютоновские, не требующие вычисления матрицы Гессе, и в то же время использующие свойства квадратичной аппроксимации минимизируемой функции. Используемые сопряженные направления поиска обеспечивают сходимость задачи минимизации квадратичной функции за r шагов, причем после r-го шага находят матрицу, обратную к матрице Гессе. Разработан ряд рекуррентных соотношений, уточняющих матрицу Гессе на каждом шаге минимизации. Численный эксперимент, проведенный на модельных примерах и тестовых задачах, показал [5], что наиболее эффективным (в смысле минимального числа расчетов минимизируемой функции) является алгоритм Бройдена-Флетчера-Гольдфарба-Шенно (BFGS):

$$H^{i+1} = H^i + (1 + \frac{y^{iT} H^i y^i}{s^{iT} y^i}) \times \frac{s^i s^{iT}}{s^{iT} y^i} - \frac{s^i y^{iT} H^i + H^i y^i s^{iT}}{s^{iT} y^i}, \quad (14)$$

где H^i – оценка матрицы, обратной к матрице Гессе, полученной на i-м шаге; $y^i = g^{i+1} - g^i$, $s^i = u^{i+1} - u^i$.

Как правило, при решении задачи оптимизации ХТС с использованием методов первого и второго порядков, аналитический вид вектора частных производных по поисковым переменным неизвестен и его значение вычисляется разностным способом:

$$\frac{\partial f}{\partial u_k} \approx \frac{f(u_1,...,u_k + \Delta u_k,...,u_n) - f(u_1,...,u_k,...,u_n)}{\Delta u_k}, \quad (15)$$

$$\Delta u_i = \mu \cdot u_i^0, \; i = 1,...,n, \quad (16)$$

где μ – коэффициент приращения по поисковой переменной;

Здесь нижний индекс обозначает номер компоненты вектора поисковых переменных. Трудность использования разностного способа расчета градиента критерия заключается в правильном подборе приращения Δu_k. Как показано в монографии [13] выбор больших значений приращений приводит к грубой оценке производных из-за погрешностей метода конечных разностей, а при малых приращениях значения производных могут искажаться вплоть до знака. По мере приближения к оптимальной точке кривизна целевой функции может меняться, очевидно что и величина приращения должна адаптироваться под расчет градиента критерия. Отметим, что наш опыт решения задач оптимального проектирования ректификационных колонн показывает, что коэффициент приращения по поисковым переменным лежит в интервале $10^{-4} \div 10^{-6}$.

При наличии ограничений типа равенств и неравенств одним из направлений решения задачи условной минимизации является сведение ее к последовательности задач без ограничений (безусловной минимизации) с помощью различных методов, строящих вспомогательную целевую функцию – модифицированный критерий [5, 9, 14]. К другому направлению относятся методы с непосредственным учетом ограничений (например, метод обобщенного приведенного градиента).

Сведение общей задачи минимизации к последовательности задач безусловной минимизации является широко распространенным подходом вследствие того, что для решения задач на безусловный экстремум разработан ряд эффективных, быстросходящихся методов.

До сих пор популярными численными методами условной минимизации, вследствие простоты и универсальности, являются методы внешних и внутренних штрафных функций [15].

Трудностей, возникающих при попытке решить многие практические задачи с высокой точностью методом штрафных функций, лишены класс численных методов, обеспечивающих геометрическую и квадратичную скорости сходимости. Такой класс методов основан на использовании модифицированных функций Лагранжа [3, 5]. Метод модифицированных функций Лагранжа является эффективным и позволяет решать многие практические задачи с достаточной точностью и быстродействием.

В последние годы огромную популярность завоевал метод последовательного квадратичного программирования, зарекомендовавший себя как мощный метод решения задач нелинейного программирования в химической технологии [3, 9, 12]. В этом методе для выбора направления поиска решается задача квадратичного программирования, числовые характеристики которой последовательно уточняются от итерации к итерации. Направление поиска определяется решением задачи, в которой матрица квадратичной формы является некоторым приближением к Гессиану функции Лагранжа оптимизационной задачи, а ограничения определяются линеаризацией нелинейных ограничений задачи:

$$\begin{gathered} \min_d (\nabla F(u^k)^T d + 0{,}5 d^T B_k d), \\ j^j(u^k) + \nabla j(u^k)^T d = 0, \; j = 1,...,N, \\ \psi^j(u^k) + \nabla \psi(u^k)^T d \le 0, \; j = 1,...,N, \\ u^{k+1} = u^k + \alpha_k d^k, \end{gathered} \quad (17)$$

где B_k есть приближение к Гессиану функции Лагранжа на шаге $k+1$ (симметрическая матрица).

На 4-м уровне процедуры оптимизации проводится генерация и поиск оптимальной схемы. Используемые в настоящее время подходы для выбора оптимальных схем разделения многокомпонентных смесей можно разделить на эвристические и алгоритмические. Эвристические методы заключаются в том, что в результате предварительного анализа действующих схем разделения формируется набор специальных правил, определяющих стратегию синтеза технологических схем. Эти правила в целом отражают физико-химические закономерности протекающих процессов и могут быть формализованы для использования в процессе компьютерного моделирования. По мере накопления опыта разделения различных смесей список эвристических правил дополняется, а сами правила трансформируются и в ряде случаев расширяются.

Приведем примеры применения эвристических правил при проектировании процессов ректификации [4-7]:

− трудноразделяемые компоненты делятся в последнюю очередь;

− эквимолярное деление исходной смеси предпочтительнее;

− компонент, присутствующий в питании в наибольшем количестве, выделяется в первую очередь;

− компоненты исходной смеси выделяются по прямой схеме (продукты отбираются сверху);

− легкополимеризующийся или вызывающий коррозию компонент выделяется в первую очередь.

Однако предложенные эвристические правила не могут учесть всей сложности и многообразия ректификационных процессов. В связи с этим они могут противоречить друг другу [5, 16] и в общем случае не могут обеспечить оптимального решения задачи синтеза. Рассмотрим возможные противоречия правил при синтезе технологических схем газоразделения. Последнее правило может войти в противоречие с предыдущими, в частности, с первым правилом. Примером наличия такого противоречия является традиционная технологическая схема разделения газов пиролиза производства этилена. Схема построена с учетом первых четырех эвристик. В этом процессе трудноразделяемыми являются пропан-пропиленовая фракция и диеновые углеводороды. Диеновые углеводороды являются побочными продуктами пиролиза и полимеризуются (если не используются специальные ингибиторы) в кубах и кипятильниках колонн деэтанизации и депропанизации, что вызывает засорение колонн и необходимость остановки оборудования для очистки от полимера.

Отсюда могут быть трудности при использовании обычного блока логического вывода с противоречащими продукционными правилами, поскольку при этом не гарантируется минимизация нарушения эвристических правил. В связи с этим Раман и Гроссман показали [17], что задача логического вывода с противоречивыми продукционными правилами может быть сведена к задаче линейного программирования, в которой в качестве критерия используется некоторая мера, характеризующая суммарное нарушение всех эвристических правил. Один из путей совместного использования алгоритмических и эвристических методов обсуждается в работах [17, 18]. Он состоит в том, что каждое эвристическое правило записывается в виде импликации. Далее каждой импликации ставится в соответствие линейное неравенство относительно структурных параметров, характеризующих наличие аппарата в синтезируемой схеме. Полученные неравенства добавляются к задаче оптимизации соответствующей гиперструктуры (описание и способы построения гиперструктур рассмотрены ниже). При этом задача становится двухкритериальной, поскольку помимо экономического критерия добавляется критерий, характеризующий меру нарушения эвристических правил. С этими работами тесно связаны работы [19, 20], в которых рассматриваются вопросы использования методов математической логики в задачах синтеза ХТС.

Среди алгоритмических методов выделяют эволюционный, метод динамического программирования, методы, основанные на дизъюнктивном программировании [21], метод ветвей и границ.

Описание эволюционного метода приведено в работах [1, 4, 22]. Согласно этому подходу для некоторой исходной схемы разделения генерируются альтернативные схемы с помощью определенных, чаще всего эвристических правил. Из них выбирается технология разделения, для которой критерий оптимальности (зачастую приведенные затраты на установку) имеет наименьшее значение. Для построенной системы вновь генерируются альтернативные схемы. Процесс модернизации схемы заканчивается, если прекращается уменьшение целевой функции. Таким образом, реализуется механизм так называемой эволюции схемы, результатом которой будет являться ХТС с наименьшим значением принятого критерия оптимальности. Недостатком этого подхода является значительная вероятность получения локальных оптимумов.

Основная идея метода динамического программирования состоит в том, что оптимальная схема синтезируется шаг за шагом, двигаясь от конца схемы к ее началу. Иными словами, сначала отыскивается оптимальный путь на графе разделения от вершин, соответствующих двух- или трехпродуктовыпгруппам, постепенно переходя к многопродуктовым группам. Обычно при использовании метода динамического программирования для синтеза схем разделения расчет элементов системы проводится с применением упрощенных моделей (метод Фенске-Андервуда-Джилленда). [1, 22]

Поиск оптимальной схемы с использованием методов дизъюнктивного программирования [21], а также методов ветвей и границ [5] основаны на использовании гиперструктуры. Гиперструктура включает в себя все возможные варианты схем для реализации процесса разделения многокомпонентных смесей. На рисунках 3, 4 приведены наиболее эффективные подходы к построению гиперструктуры синтезируемых схем.

Рассмотрим преимущества гиперструктуры (рис. 3) по сравнению с гиперструктурой представленной на рис. 4. Первое преимущество – это отсутствие фиктивных делителей потоков. Второе – существенно меньшее число колонн присутствующих в гиперструктуре. Как следствие, при решении задачи оптимального синтеза с использованием второй гиперструктуры будет значительно меньше размерность поисковой задачи [5].

Это задача дискретно-непрерывного нелинейного программирования (ДННП), в которой параметры, характеризующие структуру схемы, число тарелок и место ввода питания в колонне являются дискретными переменными, а режимные параметры являются непрерывными переменными.

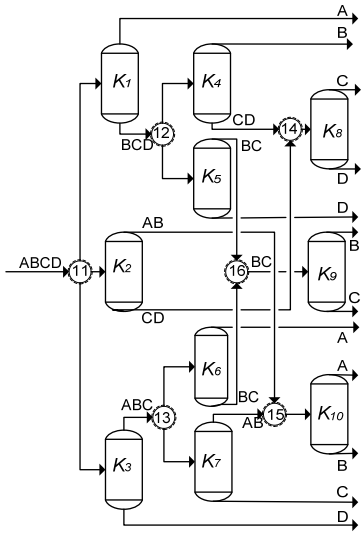

Рис. 3 - Гиперструктура системы ректификационных колонн для разделения четырехкомпонентной смеси с использованием делителей потоков: K1 – K10 – ректификационные колонны; 11, 12, 13 – делители потоков; 14, 15, 16 – смесители потоков

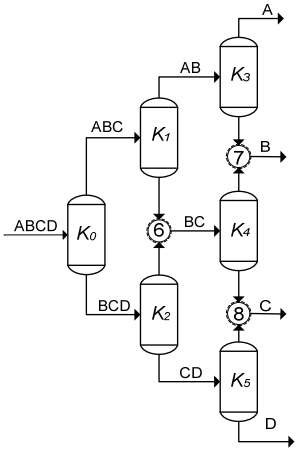

Рис. 4 - Гиперструктура системы ректификационных колонн для разделения четырехкомпонентной смеси без использования делителей потоков: K0 – K5 ректификационные колонны; 6, 7, 8 – смесители потоков

Описание предложенного алгоритма

Задача синтеза СРК при использовании второго типа гиперструктуры записывается в следующем виде [23- 25]:

$$f = \min_{x^j, u^j, m_s^j} \sum_{j=1}^{N} f^j(x^j, u^j, m_s^j), \quad (18)$$

$$\varphi^j(x^j, u^j, m_s^j) = 0, \; s = 1,2,$$

$$j = 1,...,N, \; 1 \le m_s^j \le m_s^{j,max}, \quad (19)$$

$$\psi^j(x^j, u^j) \le 0, \; j = 1,...,N, \quad (20)$$

$$F^{j_g} - D^g = 0, \; F^{r_g} - W^g = 0, \; g = 1,..,N, \quad (21)$$

где j – номер РК; x^j, u^j – переменные состояния и управляющие переменные в j -ой РК; s – номер укрепляющей ($s = 1$) и исчерпывающей ($s = 2$) секций колонн; m_s^j – число тарелок в укрепляющей (исчерпывающей) секции j -ой РК, которое в общем случае может принимать любые целые значения в пределах от 1 до m_s^{jmax} – заданное максимальное число тарелок в s -ой секции РК; $f^j(x^j, u^j, m_s^j)$ – суммарные приведенные капитальные и эксплуатационные затраты j -ой РК; уравнения (18) – математические модели укрепляющей и исчерпывающей секций j -ой РК; неравенства (19) – проектные ограничения j -ой РК; соотношения (20) характеризуют структуру системы РК, при этом соотношение $F^{j_g} - D^g = 0$ означает, что потоком питания F^{j_g} в j_g-ой РК является дистиллят D^g g-ой колонны; а соотношение $F^{r_g} - W^g = 0$ означает, что потоком питания F^{r_g} в r_g-ой колонны является кубовый продукт W^g g-ой РК; N – число РК в гиперструктуре.

Эффективным методом решения задачи ДННП является метод ветвей и границ (ВГ). Метод ВГ основан на использовании гиперструктур и не является полностью формализованной процедурой. Для использования метода ВГ необходима разработка принципа ветвления, подходов к определению нижней и верхней оценок критерия оптимальности.

В работе [25] предлагается новый подход, в котором мы заменяем дискретные переменные, которые не могут быть непрерывными (числа тарелок), на новые переменные, которые могут принимать как дискретные, так и непрерывные значения. Для этого мы в каждом уравнении (5), связывающем рабочие и равновесные концентрации разделяемых компонентов вводим искусственную переменную α_{sk}^j следующим образом:

$$y_{is}^{jk} = y_{is}^{j,k+1} + \alpha_{sk}^j E_{is}^{jk}(y_{is}^{*jk} - y_{is}^{j,k+1}), \quad (22)$$

где y_{is}^{jk} – состав паровой фазы, покидающий k-ую тарелку j-ой РК, y_{is}^{*jk} состав равновесной паровой фазы, покидающий k-ую тарелку j-ой РК. Легко проверить, что если α_{sk}^j=1, то k-ая тарелка присутствует в s-ой секции j-ой РК, если α_{sk}^j=0, то этой тарелки нет. С другой стороны параметры α_{sk}^j могут принимать и непрерывные значения в интервале $0 \le \alpha_{sk}^j \le 1$.

Нижняя оценка оптимального значения критерия задачи (18) получается решением следующей задачи:

$$f = \min_{x^j, u^j, \alpha_s^j} \sum_{j=1}^{N} f^j(x^j, u^j, \alpha_s^j), \quad (23)$$

$$\varphi^j(x^j, u^j, \alpha_s^j) = 0, \; s = 1,2, \; j = 1,...,N, \quad (24)$$

$$\psi^j(x^j, u^j) \le 0, \; j = 1,...,N, \quad (25)$$

$$F^{j_g} - D^g = 0, \; F^{r_g} - W^g = 0, \; g = 1,..,N, \quad (26)$$

$$0 \le \alpha_s^j \le 1, \; \alpha_s^j = (\alpha_{s1}^j, \alpha_{s2}^j, ..., \alpha_{sm_s^{jmax}}^j)^T. \quad (27)$$

Верхнюю оценку будем вычислять на основе суммы дискретных значений параметров

$\sum_{k=1}^{m_s^{j,max}} (\alpha_{sk}^j)^*$, округленных до ближайшего целого числа, где $(\alpha_{sk}^j)^*$ – получены решением задачи (23).

Обычный метод ВГ состоит в построении дерева вариантов СРК в пространстве всех дискретных переменных α_{sk}^j. Каждому варианту соответствует некоторый набор переменных α_{sk}^j. В этом случае на каждом шаге метода ветвей и границ удаляется из числа варьируемых некоторый параметр α_{sk}^j, и множество варьируемых дискретных переменных разбивается на два подмножества, в одном из которых параметр α_{sk}^j принимает значение 1, а в другом 0. При этом, первому множеству соответствует множество схем, в которых присутствует тарелка, соответствующая параметру α_{sk}^j, а в другом отсутствует. Будем условно говорить, что при стандартном применении метода ВГ ветвление проводится «по тарелкам». Число всех дискретных переменных равно, $\sum_{j=1}^{N}(m_1^j + m_2^j)$.

Для уменьшения числа поисковых переменных в работе [26] предлагается новый принцип ветвления, в котором при построении дерева решений из числа варьируемых переменных будет удаляться вся совокупность параметров, соответствующих какой-либо из колонн. Фактически это означает, что из гиперструктуры удаляется *j*-ая колонна, если удаляется совокупность параметров, соответствующих этой колонне.

Сложности решения поставленных в настоящей работе задач заключаются в высоких требованиях к точности математических моделей описываемых процессов и к методам расчета термодинамических и физико-химических свойств веществ, участвующих в процессе, многомерности задачи расчета и оптимизации, сложности расчета критерия оптимальности, многовариантности.

Первые три уровня задачи синтеза оптимальной последовательности системы ректификационных колонн могут быть реализованы с помощью универсальной моделирующей программы (УМП) [27]. Из всего множества предлагаемых на рынке программных средств моделирования ХТП и ХТС лидирующие места занимают следующие УМП: UNISIM DESIGN (фирма Honeywell International, Inc., USA, www.honeywell.com), ChemCad (фирма Chemstations Inc., USA, Texas, www.chemstation.com), PRO/II (фирма Invensys, USA www.simsci.com). Генерация альтернативных схем осуществляется с помощью надстройки УМП.

Работоспособность предложенного многоуровневого алгоритма проверена на примере решения задачи синтеза СРК для разделения потока широкой фракции легких углеводородов на четыре продуктовых потока [28].

Выводы

Приведена формализованная постановка задачи оптимального синтеза системы ректификационных колонн (СРК), из которой следует, что она сводится к задаче дискретно-непрерывного нелинейного программирования. Эффективным методом ее решения является метод ветвей и границ. На каждом шаге метода ветвей и границ для определения верхней и нижней границ критерия оптимальности решается задача нелинейного программирования. Для ее решения целесообразно использование метода последовательного квадратичного программирования, который опирается на использование квазиньютоновских методов безусловной оптимизации. Для расчета критерия оптимальности проектируемой системы ректификационных колонн при заданных значениях поисковых переменных необходимо использование современных методов расчета ректификационных колонн, к числу которых в настоящее время относится метод Inside-Out.

Таким образом, оптимальное проектирование СРК представляет собой многоуровневую процедуру, на каждом уровне которой должны использоваться эффективные алгоритмы, согласованные между собой и обеспечивающие эффективность работы всего вычислительного комплекса.

Литература

1. Ю.А. Комиссаров, Л.С. Гордеев, Д.П. Вент, *Научные основы процессов ректификации: Т.2. Учебное пособие для вузов*. Химия, Москва, 2004. 207 с.
2. I. Grossmann , P. Aguirre, M. *Bartfeld. Comput. Chem. Eng*., **29**, 1203-1215 (2005).
3. Г.М. Островский Г.М., Н.Н. Зиятдинов, Т.В. Лаптева, *Оптимизация технических систем*. КноРус, Москва, 2012. 432 с.
4. Н.В. Лисицын, В.К. Викторов, Н.В. Кузичкин, *Химико-технологические системы: Оптимизация и ресурсосбережение.* Менделеев,Санкт-Петербург, 2007. 312 с.
5. Г.М. Островский Г.М., Ю.М. Волин, Н.Н. Зиятдинов, *Методы оптимизации химико-технологических процессов*. КДУ, Москва, 2008. 424 с.
6. В.В. Кафаров, В.Н. Ветохин, *Основы автоматизированного проектирования химических производств*. Наука, Москва, 1987. 623 с.
7. W. D. Seider, J. D. Seader, D. R. Lewin, S. Widagdo, *Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis, and Evaluation*. Wiley, 2004. 1122 pp.
8. Ю.А. Комиссаров, Л.С. Гордеев, Д.П. Вент, *Научные основы процессов ректификации: Т.1. Учебное пособие для вузов*. Химия, Москва, 2004. 270 с.
9. L.T. Biegler, I.E. Grossmann, A.W. Westerberg, *Systematic Methods of Chemical Process Design. Prentice.* Hall, 1997. 796 pp.
10. А.Г. Лаптев, Н.Г. Минеев, П.А. Мальковский, *Проектирование и модернизация аппаратов разделения в нефте- и газопереработке*. Печатный двор, Казань, 2002. 220 с.
11. Р. Рид, Дж. Праусниц, Т. Шервуд, *Свойства газов и жидкостей: справочное пособие*. Химия, Ленинград, 1982. 592 с.
12. L. T. Biegler, *Nonlinear Programming – Concepts, Algorithms, and Applications to Chemical Processes.* SIAM Society for Industrial and Applied Mathematics & MOS Mathematical Optimization Society, Philadelphia, 2010.
13. Г. М. Островский, Т. А. Бережинский, А. Р. Беляева, *Алгоритмы оптимизации химико-технологических процессов*. Химия, Москва, 1978. 296 с.
14. М. Базара, И. Шетти, *Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы*. Мир, Москва, 1982. 583 с.

15. Ю.М. Данилов, А.Г. Мухаметзянова, Е.А. Петровичева, *Хим.пром-сть*, **3**, 205-210 (2005).
16. В.С.Тимофеев, Л.А. Серафимов, *Принципы технологии основного органического и нефтехимического синтеза.* Высшая школа, Москва, 2003. 536 с.
17. R. Raman, I. Grossmann, *Comp. Chem. Eng*., **15**, 2, 73-79 (1991).
18. R. Raman, I. Grossmann, *Comp. Chem. Eng*., **16**, 3, 155-162 (1993).
19. R. Raman, I. Grossmann, *Comp. Chem. Eng*., **17**, 9, 904-910 (1993).
20. R. Raman, I. Grossmann, *Comp. Chem. Eng*., **18**, 7, 563-570 (1994).
21. M. Barttfeld, P. Aguirre, I. Grossmann,. *Comput. Chem. Eng*., **29**, 2165-2166 (2004).
22. Ф. Б. Петлюк, Л. А. Серафимов, *Многокомпонентная ректификация.* Химия, Москва, 1983. 304с.
23. Г.М. Островский, Н.Н. Зиятдинов, Т.В. Лаптева, Д.А. Рыжов, *Теоретические основы химической технологии*, **42**, 3, 401-412 (2008).
24. Н.Н. Зиятдинов. Н.Ю. Богула, Т.В. Лаптева, Г.М. Островский, *Вестник Казанского технологического университета*, **5**, 118-123 (2011).
25. Г.М. Островский, Н.Н Зиятдинов, Т.В Лаптева, Н.Ю Богула, *Доклады академии наук*, **431** 6, 768-771 (2010).
26. Г.М. Островский, Н.Н Зиятдинов, Ф. У. Мустафина, *Доклады академии наук*, **450,** 1, 58-61 (2013).
27. Ю. Н. Зиятдинова, Н.Н. Зиятдинов, *Вестник Казанского технологического университета*, **9**, 735-738 (2010).
28. G. M. Ostrovskii, N. N. Ziyatdinov, F. U. Mustafina, D. A. Rygov, *Theor. found. chem. eng*., **47**, 6, 646-655 (2013)

© **Н. Н. Зиятдинов –** д.т.н., проф., зав. каф. системотехники КНИТУ, nnziat@yandex.ru; **Ф. У. Закирова –** асс. той же кафедры, firyuza.zakirova@mail.ru; **Д. А. Рыжов -** к.т.н., доц. той же кафедры, ryzhov.denis@inbox.ru; **А. А. Караванов –** ст. препод. той же кафедры, k.ant@mail.ru.